



Contribution ID: 35

Type: not specified

Расчет электронной структуры атома московия с помощью квантовых алгоритмов

Monday 27 May 2024 15:40 (20 minutes)

Знание электронной структуры необходимо для понимания свойств атомов, химических соединений и материалов. Учет электронных корреляций остается довольно сложной задачей, несмотря на значительный прогресс в развитии вычислительных методов и аппаратного обеспечения. Фундаментальное ограничение, которое препятствует точному описанию многоэлектронных систем на классических компьютерах, связано с экспоненциальным ростом конфигурационного пространства при увеличении числа активных частиц. Естественный способ преодолеть это препятствие — проводить расчеты квантовых систем на квантовых устройствах. Такие вычисления требуют совершенно новых алгоритмов, использующих квантовые эффекты.

Целью представленной работы является исследование применимости квантовых алгоритмов к задаче расчета электронной структуры атомных систем на примере основного состояния атома московия. Расчеты проводились с помощью двух квантовых алгоритмов: Iterative Quantum Phase Estimation (iQPE) и Variational Quantum Eigensolver (VQE) с различными оптимизаторами и типами анзацев. Атом московия был выбран из-за наполовину заполненной p -оболочки в основной конфигурации, что затрудняет расчет энергии основного состояния с использованием стандартного метода связанных кластеров. Продемонстрировано, что расчеты с помощью VQE могут быть успешно реализованы в конфигурационном пространстве, содержащем около 500 000 детерминантов Слейтера.

1. V. A. Zaytsev, M. E. Groshev, I. A. Maltsev, A. V. Durova, V. M. Shabaev, *Int. J. Quant. Chem.*, 124, 1, e27332 (2023)

Author: DUROVA, Anastasiia (St. Petersburg State University)

Co-authors: Dr MALTSEV, Ilya (St. Petersburg State University); GROSHEV, Maksim (St. Petersburg State University); Prof. SHABAEV, Vladimir (St. Petersburg State University)

Presenter: DUROVA, Anastasiia (St. Petersburg State University)